

Розробник:

Доктор фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник, провідний науковий співробітник _____ Ігор ГЕРАСИМЧУК
(підпис)

Робочу програму узгоджено науково-методичною радою

Протокол від 30.08.2022р. № 1

Голова науково-методичної ради _____ Ольга САЛЮК
(підпис)

Робочу програму затверджено Вченою радою ІМаг НАН України та МОН України

Протокол від 06 вересня 2022 № 5-22

Голова Вченої ради _____ Олександр ТОВСТОЛИТКІН
(підпис)

Робочу програму погоджено з гарантом освітньої програми (керівником освітньої програми): Прикладна фізика та наноматеріали 06 вересня 2022 р.

(назва освітньої програми)
Гарант освітньої програми _____ Олександр ТОВСТОЛИТКІН
(підпис)

Пролонговано Вченою радою ІМаг НАН України та МОН України:



| навчальні роки пролонгації | Голова Вченої ради ІМаг НАН України та МОН України | підпис | № протоколу, дата протоколу |
|----------------------------|--|--------|-----------------------------|
| 20 / 20 | █ | | ã |
| 20___/ 20___ | | | |
| 20___/ 20___ | | | |
| 20___/ 20___ | | | |



ВИБРАНІ РОЗДІЛИ КОМП'ЮТЕРНОГО АНАЛІЗУ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

| | |
|---|---|
| Рівень вищої освіти | <i>Третій (освітньо-науковий)</i> |
| Галузь знань | <i>10 Природничі науки</i> |
| Спеціальність | <i>105 Прикладна фізика та наноматеріали</i> |
| Освітня програма | <i>Прикладна фізика та наноматеріали</i> |
| Статус дисципліни | <i>Нормативна</i> |
| Форма навчання | <i>очна(денна)</i> |
| Рік підготовки, семестр | <i>2 курс, осінній семестр</i> |
| Обсяг дисципліни | <i>120 годин (4 кредити): 18 годин лекцій, 36 годин лабораторних, СРС – 66 год.</i> |
| Семестровий контроль/ контрольні заходи | <i>Екзамен / МКР</i> |
| Розклад занять | <i>Час і місце проведення аудиторних занять викладені на сайті http://ukr.imag.kiev.ua</i> |
| Мова викладання | <i>Українська</i> |
| Інформація про керівника курсу / викладачів | <i>Лектор: доктор фіз.-мат. наук, старший наук. співроб. Герасимчук І.В., e-mail: igor.gera@gmail.com Лабораторні: доктор фіз.-мат. наук, старший наук. співроб. Герасимчук І.В., e-mail: igor.gera@gmail.com</i> |
| Розміщення курсу | <i>Посилання на дистанційний ресурс: http://ukr.imag.kiev.ua</i> |

Програма навчальної дисципліни

Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Досягнення сучасної науки в сфері високих технологій – електроніці, інформаційних технологіях, мікромеханіці – пов'язані з фундаментальними і прикладними дослідженнями, конструюванням і практичним використанням матеріалів і пристроїв, елементи яких мають розміри менше 100 нанометрів. Принципово нові фізичні властивості таких об'єктів зумовлюють унікальні експлуатаційні характеристики прикладних розробок, створених на базі інтеграції багатьох «первинних» нанорозмірних елементів. Елементна база, в свою чергу, потребує розвитку фізико-технічних засад керованого синтезу її складових, що потребує оптимізації низки фізичних процесів для формування необхідних фізичних властивостей об'єктів наносвіту. В значній мірі вирішення комплексу вказаних проблем пов'язано з чисельним моделюванням динаміки систем з багатьох тисяч атомів, що забезпечено постійно зростаючими обчислювальними ресурсами сучасних комп'ютерних систем.

Пакети вже розроблених командами науковців/програмістів відповідних програм значно полегшують виконання фізичних досліджень, але часто виникає необхідність проведення дослідження в незвичному ракурсі. Для здавалось би незначного, на перший погляд, корегування відомих алгоритмів потрібно в досконалості знати як математичні основи цих алгоритмів, так і технічні хитрощі при написанні відповідного коду. Крім того, молодим дослідникам не часто

вдається якісно інтерпретувати отримані результати для встановлення глибинних зв'язків між різноманітними фізичними факторами, важливих для побудови цілісної теорії явища, що вивчається. Запропонований учбовий курс на конкретних прикладах поглиблено знайомить з принципами, які закладені в основи фізичних обчислень, та дає навички побудови якісних моделей фізичних явищ для встановлення головних факторів, які визначають їх динаміку і відкривають можливості контрольованого впливу на неї при варіації внутрішніх та зовнішніх параметрів. Крім того, на лабораторних заняттях аспіранти набудуть досвід представлення отриманих результатів в презентаціях високого рівня інформативності, структурованості, легкого, але вагомого розкриття змісту доповідей і, що також важливо, художнього оформлення графічного та відеоматеріалу досліджень.

Програмні компетентності:

Загальні компетентності (ЗК):

ЗК 1. Здатність проводити критичний аналіз, оцінку і синтез нових і складних ідей, переосмислювати наявне та створювати нове цілісне знання та/або професійну практику, розв'язувати значущі наукові та інші проблеми.

ЗК 4. Здатність застосовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології у різних видах професійної діяльності.

ЗК 5. Здатність знаходити, обробляти й аналізувати необхідну інформацію для вирішення проблем й прийняття рішень.

ЗК 10. Здатність працювати в команді, мотивувати інших у досягненні поставленої мети, формувати позитивні відношення з колегами.

Спеціальні (професійні, фахові, предметні) компетентності (ФК):

ФК 03. Здатність осмислювати та аналізувати результати експериментальних досліджень, встановлювати зв'язок з теоретичними моделями, вирізняти із накопичених спостережень відтворювані експериментальні факти. Здатність адаптувати і узагальнювати результати сучасних досліджень в галузі прикладної фізики для вирішення наукових і практичних проблем.

ФК 04. Здатність самостійно здійснювати науково-дослідну та науково-педагогічну діяльність у галузі прикладної фізики з використанням новітніх наукових теорій, методів та інноваційних технологій. Здатність організовувати навчальний процес, проводити практичні та лабораторні заняття з фізичних дисциплін у закладах вищої освіти.

ФК 05. Здатність обирати методи та критерії оцінки дослідження відповідно до цілей та завдань наукового проекту, інтерпретувати результати наукових досліджень, проводити їх коректний аналіз та узагальнення.

ФК 07. Здатність розуміти та застосовувати цифрові технології та прикладні математичні пакети для розв'язування фізичних задач, аналізу результатів експериментальних досліджень, моделювання фізичних процесів та систем.

ФК 08. Здатність проводити дослідження складних систем, їх системний та синергетичний аналіз, використовувати моделі та методи моделювання в наукових дослідженнях.

Програмні результати навчання (ПРН):

Знання:

ПРН 1. Системні знання у галузі фізики та інших природничих наук, включаючи оволодіння методами наукового дослідження при здійсненні професійної діяльності.

ПРН 4. Знання сучасних концепцій розвитку інформаційно-комунікаційних технологій, основ програмування певних процесів та об'єктів за темою наукового дослідження.

Уміння:

ПРН 8. Вміння обирати теоретичні й експериментальні методи дослідження, відповідні методи системного і синергетичного аналізу, застосовувати моделі та методи моделювання та інноваційні підходи для розв'язання складних завдань і проблем в науково-дослідній та/або інноваційних сферах.

ПРН 10. Вміння збирати та інтерпретувати наукову та фахову інформацію, з використанням сучасних інформаційно-комунікаційних технологій та пошукових систем.

ПРН 11. Вміння використовувати сучасні методи і технології професійної комунікації українською та іноземними мовами.

ПРН 12. Вміння ефективно взаємодіяти в професійному середовищі й соціумі в цілому, результативно, науково і професійно працювати над новими ідеями як індивідуально, так і як член творчої команди.

ПРН 13. Вміння формулювати свої професійні висновки, особисті результати і досягнення та розумно їх обґрунтовувати для фахової та не фахової аудиторії.

Комунікація:

ПРН 17. Ефективно працювати в команді, мати навички міжособистісної взаємодії.

ПРН 18. Уміти використовувати сучасні інформаційні та комунікативні технології при спілкуванні, обміні інформацією, зборі, аналізі, обробці, інтерпретації джерел.

Автономія та відповідальність:

ПРН 20. Самовдосконалюватися, нести відповідальність за новизну наукових досліджень та прийняття експертних рішень.

*При засвоєнні матеріалу дисципліни аспіранти отримають досвід побудови складних математичних моделей в різних розділах фізики: квантовій механіці, сингулярній оптиці, акустичних метаматеріалах, фізики квазіодновимірних нанооб'єктів. Всі перелічені розділи відрізняються назвами, але базові підходи для чисельного дослідження фізичних процесів різного походження багато в чому співпадають. Рідко яка фізична проблема має точне вирішення. В кожному конкретному випадку перед дослідником стоїть задача вибору різного роду наближень, які не повинні значно спотворювати кінцевий результат. Відповідно до цих наближень будується (або обирається) математична модель явища (пакет програм), яка забезпечить і точність результату, і фізичну реальність часу обчислень. Дати аспірантам відповідний досвід в вирішенні перелічених вище проблем (загальних для багатьох розділів сучасної фізики) на конкретних прикладах – **мета** представленого курсу.*

Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Вивчення даної дисципліни базується на дисциплінах «Фізика твердого тіла», «Термодинаміка і статистична фізика», «Квантова механіка» бакалаврського рівня вищої освіти. Необхідні також знання вищої математики та досвід математичного моделювання і програмування, який аспіранти отримують під час навчання на 1–4 курсах бакалаврату та в магістратурі. Необхідним також є базовий рівень володіння англійською мовою для читання посібників та оригінальних наукових статей в англійськомовних журналах.

Знання, отримані аспірантами з дисципліни «Вибрані методи комп'ютерного аналізу», використовуються при підготовці аспірантами наукових доповідей та наукових статей, а також при написанні та захисті дисертації.

Зміст навчальної дисципліни

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 120 годин/4 кредити ECTS.

| Форма навчання | Всього | | Розподіл навчального часу за видами занять | | | | | Семестрова атестація |
|----------------|----------|-------|--|---------------------|------------------------|-----|----------------------|----------------------|
| | Кредитів | Годин | Лекції | Лабораторні заняття | СРС | | | |
| | | | | | Підготовка до екзамену | МКР | Підготовка до занять | |
| Денна | 4 | 120 | 18 | 36 | 30 | 10 | 26 | Екзамен |

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

- Тема 1.** Загальні принципи побудови математичної моделі фізичного процесу. Характеристика моделей різних типів в залежності від цілей досліджень та прийнятних фізичних наближень. Різницеві схеми апроксимації диференційних рівнянь. Їх загальна порівняльна характеристика. Консервативні різницеві схеми та їх чисельна стійкість.
- Тема 2.** Рівняння в часткових похідних параболічного типу в явищах переносу речовини, квантовій механіці, оптиці, електродинаміці. Методи чисельного розв'язку квазілінійних рівнянь такого типу.
- Тема 3.** Чисельне вивчення ефектів тунелювання та надбар'єрного відбивання в квантовій механіці. Квазікласична модель якісної інтерпретації цих ефектів. Розвиток навичок передбачення результатів моделювання при варіації параметрів як хвильового пакету (елементарної частинки), так і потенційного бар'єру на основі розвинутих якісних концепцій цих явищ.
- Тема 4.** Сингулярна оптика, обертальний момент оптичних вихорів. Методи генерації оптичних вихорів. Якісний аналіз трансформації хвильового фронту лазерного променя при формуванні оптичного вихора. Чисельне моделювання само відродження оптичного вихору за непрозорим екраном, який відсікає його більшу частину. Глибокий якісний аналіз цього незвичного і повчального фізичного явища.
- Тема 5.** Проблеми фокусування сильнострумових потоків важких іонів. Принципи роботи плазмової лінзи. Методи моделювання плазмових систем на прикладі цього пристрою. Побудова фізичних концепцій при вирішенні проблем пошуку оптимальних параметрів лінзи (найбільш ефективного розподілу потенціалу на циліндричних електродах та розподілу магнітного поля в її об'ємі).
- Тема 6.** Оригінальні алгоритми розрахунку електричного та магнітного полів на прикладі плазмової лінзи. Методи формування рівнянь для густини електричного заряду на електродах системи та густини поверхневих струмів намагнічування на її магнітних елементах.
- Тема 7.** Методи Монте-Карло для дослідження динаміки багаточастинкових систем. Методи молекулярної динаміки. Модель решіткового газу. Поверхнева дифузія атомамів. Умова детального балансу в Монте-Карло моделях та методика контролю його виконання.
- Тема 8.** Високоточні консервативні схеми інтегрування самоузгоджених рівнянь руху частинок в випадках, коли критичним для результату моделювання є їх навіть над малий «чисельний розігрів/охолодження». Приклади: оптимізація пастки для ультрахолодних нейтронів,

динаміка системи магнітних моментів в магніторезонансній мікроскопії.

Тема 9. *Синтез наночастинок та просторово-періодичних наноструктур в дифузійному режимі. Самоузгоджена трансформація просторових і поверхневих дифузійних потоків атомів з модифікацією форми наночастинок в процесі синтезу. Фізичні засади керування геометричними параметрами самовпорядкованої синтезованої наноструктури. Монте-Карло модель динаміки таких систем.*

Навчальні матеріали та ресурси

БАЗОВА ЛІТЕРАТУРА

1. Computational Physics-Problem Solving with Computers, Enlarged eTextBook Python 3rd Edition. RUBIN H. LANDAU, Oregon State University; MANUEL JOSE PAEZ, University of Antioquia; CRISTIAN C. BORDEIANU, University of Bucharest, 526 p.
2. Computational Physics, Morten Hjorth-Jensen. University of Oslo, Fall 2010, 514 p.
3. Computational Physics, Richard Fitzpatrick, Professor of Physics, The University of Texas at Austin, 322 p.
4. Computational Physics. Simulation of Classical and Quantum Systems, Philipp O.J. Scherer. Springer, 2010, 336 p.
5. Magnetic Resonance Force Microscopy and a Single-Spin Measurement. Gennady P Berman, Fausto Borgonovi, Vyacheslav N Gorshkov, Vladimir I Tsifrinovich. World Scientific, 2006, 235 p.

ДОДАТКОВА ЛІТЕРАТУРА

6. Modeling and Computational Methods for Kinetic Equations, 2009, Series Editor Nicola Bellomo, Springer Science+Business Media, LLC, 359 p.
7. Monte Carlo methods for applied scientists. 2015, I. Dimov, World Scientific, 308 p.
8. Numerical Problems in Solid State Physics, M.A. Wahab. Narosa, 141 p.
9. Computational Physics. David Potter, Imperial College, London, 285 p.
10. Computational Physics With Python, Dr. Eric Ayars, California State University, Chico, 194 p.

Навчальний контент

Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

ЛЕКЦІЙНІ ЗАНЯТТЯ

| № з/п | Назва теми лекції та перелік основних питань (перелік дидактичного забезпечення, посилання на літературу та завдання на СРС) |
|-------|--|
| 1 | Вступ. Загальні принципи побудови математичної моделі фізичного процесу, характеристика моделей різних типів в залежності від цілей досліджень та прийнятих фізичних наближень. Явні та неявні різницеві схеми. Проблема стійкості обчислень в інтегруванні диференціальних рівнянь. Методика визначення необхідних (і достатніх) розмірів комірок різницевої схеми. Переваги консервативних різницевих схем. Інтегрування систем диференціальних рівнянь. |
| 2 | Різноманіття фізичних явищ, математичний опис яких базується на диференціальному рівнянні в часткових похідних параболічного типу. Явна, суто |

| | |
|---|---|
| | <p>неявна різницева схема та схема Кранка-Николса для його інтегрування. Відмінності у властивостях цих схем при застосуванні в області комплексних чисел. Метод змінних напрямків в 2-3-вимірних системах. Метод прогонки розв'язку систем лінійних алгебраїчних рівнянь з три-діагональною матрицею.</p> |
| 3 | <p>Хвильовий пакет в оптиці та квантовій механіці. Фазова швидкість його складових та групова швидкість пакету як цілого в різних середовищах. «Розпливання» хвильового пакету у просторі. Квазікласична інтерпретація ефектів тунелювання та надбар'єрного відбивання в квантовій механіці. Чисельне моделювання цих процесів та методика аналітичних оцінок їх фізичних характеристик. Проходження елементарної частинки через дворівневу квантову систему.</p> |
| 4 | <p>Опис поширення лазерного променя в параксіальному наближенні. Фізика формування оптичного вихору, його обертальний момент. Використання оптичних вихорів в пристроях нанооптики та в наномеханіці. Чисельне моделювання поширення «залишку» оптичного вихора після проходження непрозорого екрану. Чисельне моделювання поширення двох співвісних гаусових променів різної ширини з формуванням «доріжки Кармана» оптичних вихорів.</p> |
| 5 | <p>Фокусування потоків заряджених частинок. Сильнострумові квазінейтральні потоки та проблеми їх фокусування. Конструкція плазмової лінзи з комбінацією електричних і магнітних полів. Еквіпотенціальність силових ліній магнітного поля в лінзі. Методи чисельного моделювання динаміки плазмових систем на прикладі плазмової лінзи.</p> |
| 6 | <p>Методи розрахунку електричного поля в системах електродів із заданими потенціалами їх поверхні. Алгоритм визначає розподіл густини електричного заряду на електродах з подальшою можливістю обчислення потенціалу/напруженості електричного поля в довільних зонах простору. Аналогічний алгоритм визначає поверхневі струми магнетика, який знаходиться в зовнішньому магнітному полі.</p> |
| 7 | <p>Метод Монте-Карло в дослідженні динаміки багаточастинкових систем. Методи генерації випадкових чисел з довільним законом розподілу. Методика вибору мінімальної кількості частинок в системі для визначення її властивостей. Необхідність виконання принципу детального балансу при моделюванні. Загальні характеристики моделі решіткового газу.</p> |
| 8 | <p>Чисельне інтегрування рівнянь руху частинок в зовнішніх полях часто потребує точного виконання закону збереження її енергії або магнітного моменту. Це не завжди вдається реалізувати внаслідок як похибок різницевої апроксимації рівнянь руху, так і внаслідок похибок обчислень із скінченною кількістю розрядів в представленні чисел. В результаті цього частинки або невинувато збільшують свою енергію, або «охолоджуються», що може значно спотворити результат моделювання та привести до розробки фізичного обладнання, яке не продемонструє бажаних параметрів. Вказані фіктивні ефекти «розігріву/охолодження» виключені в оригінальних алгоритмах розрахунку траєкторій частинок.</p> |
| 9 | <p>Синтез наноструктур в дифузійному режимі осадження вільних атомів на їх поверхню супроводжується взаємодією форми нанокластерів, що формуються, на розподіл густини поверхневих та просторових дифузійних потоків, які, в свою чергу, впливають на еволюцію форми наночастинок в процесі їх синтезу. Вивчення оригінальної моделі Монте-Карло динаміки нанокластерів,</p> |

| | |
|--|--|
| | яка, як показав досвід її використання, «виловлює» майже всі експериментально знайдені особливості трансформації морфології нанооб'єктів, довело спроможність передбачити нові фізичні ефекти та запропонувати методи керування синтезом впорядкованих наноструктур. |
|--|--|

ЛАБОРАТОРНІ ЗАНЯТТЯ

| № з/п | <i>Назва лабораторної роботи (комп'ютерного практикуму)</i> |
|----------|--|
| 1 | Знайомство з графічним редактором VMD для зображення багатоатомних молекул. Створення відеофайлів для демонстрації структур молекул та динаміки нанооб'єктів. |
| 2-3 | Написання власного програмного коду для одновимірного нестационарного рівняння Шредінгера. Моделювання процесів тунелювання та надбар'єрного відбиття. Оцінка порогових значень енергії для цих ефектів. |
| 4-5-6 | Написання програмного коду для моделювання поширення лазерного променя. Вивчення самовідродження оптичного вихору після відсікання його більшої частини непрозорим екраном. Генерація «доріжки Кармана» оптичних вихорів при комбінації двох співвісних Гаусових променів та при проходженні одного такого променя через дугоподібну щілину. Якісна інтерпретація цього ефекту та відеопрезентація механізму формування цієї доріжки на базі відображення трансформації фазової карти комбінованого променя. |
| 7-8-9 | Розробка програмного коду для розрахунку силових ліній напруженості електричного поля системи аксіальних циліндричних електродів з заданими потенціалами. Виконання такого ж завдання для зарядженого кільця, розташованого паралельно провідному напівпростору. |
| 10-11 | Стандартні генератори рівномірного розподілу випадкових чисел в інтервалі [0,1]. Періоди повторювання послідовностей квазівипадкових чисел та штучні фізичні ефекти, які можуть виникати внаслідок квазівипадковості чисел, що генеруються. Принципи вибору оптимального генератора для задач різного походження для нейтралізації штучних ефектів. Написання коду програми генерування випадкових чисел з довільним законом розподілу. Програма тестування створеного генератора. |
| 12-13-14 | Динаміка власного магнітного моменту елементарної частинки в періодичних у часі схрещених зовнішніх магнітних полях. Моделювання продольної та поперечної релаксації внаслідок «шуму» в магнітних полях. Спінове відлуння в магніторезонансній томографії. |
| 15-16 | Двовимірна Монте-Карло модель решіткового газу на простій квадратній ґратці. Визначення критичної концентрації адатомів для початку формування стійких кластерів. Рівноважна конфігурація кластеру і її відповідність конфігурації Вульфа. |
| 17-18 | Фізика розпаду нанодроту на нанокластери. Густина поверхневої енергії на кристалічній грані. Визначення анізотропії цієї густини методом підрахунку розірваних зв'язків. Шороховатий перехід та його термодинамічні характеристики. |

Самостійна робота здобувача вищої освіти

Самостійна робота здобувача наукового ступеня доктора філософії є основним засобом засвоєння навчального матеріалу у вільний від навчальних занять час і включає:

| № п/п | Зміст самостійної роботи | Обсяг СР (годин) |
|---|---------------------------------|------------------|
| 1 | Підготовка до аудиторних занять | 26 |
| 2 | Підготовка до МКР | 10 |
| 3 | Підготовка до екзамену | 30 |
| Усього за навчальною дисципліною | | 66 |

Політика та контроль

Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Система вимог, які викладач ставить перед аспірантом:

- правила відвідування занять: присутність або відсутність здобувача на аудиторному занятті, в тому числі нарахування заохочувальних або штрафних балів, не оцінюються. Відповідно до РСО даної дисципліни заохочувальні бали нараховуються за відповідні види навчальної активності на лекційних та лабораторних заняттях;
- правила поведінки на заняттях: студент має можливість отримувати бали за відповідні види навчальної активності на лекційних заняттях, передбачені РСО дисципліни. Використання засобів зв'язку для пошуку інформації на гугл-диску викладача та в інтернеті здійснюється за умови вказівки викладача;
- політика дедлайнів та перескладань: якщо аспірант не проходив або не з'явився на МКР без поважної причини, його результат оцінюється у 0 балів. Перескладання результатів МКР не передбачено;
- політика щодо академічної доброчесності;
- інші вимоги, що не суперечать законодавству України та нормативним документам Інституту магнетизму.

Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (РСО)

Поточний контроль: опитування за темою заняття та за результатами самостійної роботи, МКР.

Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силябусу.

Семестровий контроль: екзамен.

Умови допуску до семестрового контролю: відсутні.

На першому занятті аспіранти ознайомлюються із рейтинговою системою оцінювання (РСО) дисципліни.

Рейтинг аспіранта з дисципліни протягом семестру складається з балів, які він отримує:

- 1) на лабораторних заняттях;
- 2) за модульну контрольну роботу (МКР).

Система рейтингових балів:

1) Лабораторні заняття. Ваговий коефіцієнт дорівнює 8 за кожний власноручно написаний програмний код. Максимальна кількість балів, які може отримати аспірант на лабораторних заняттях становить $6 \times 8 = 48$ балів. Нархування балів за один програмний код:

– відмінні відповіді з глибоким розуміння фізичного ефекту, що вивчається, – 8 балів;

- дуже добрі, добрі відповіді – 6 балів;
- задовільні, достатні відповіді – 4 бали.

2) Модульна контрольна робота (МКР). Ваговий коефіцієнт дорівнює 12. Максимальна кількість балів за контрольну роботу становить $1 \times 12 = 12$ балів. Нарахування балів за контрольну роботу:

- «відмінно», повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 11-12 балів;
- «добре», достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації або незначні неточності) – 9-10 балів;
- «задовільно», неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки) – 7-8 балів;
- «незадовільно», незадовільна відповідь (менше 60% потрібної інформації) – 0 балів.

3) Екзамен. Завдання містить два теоретичні питання, кожне з яких оцінюється у 20 балів. Всього $2 \times 20 = 40$ балів. Нарахування балів за екзаменаційну відповідь:

- повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації) – 36-40 балів;
- достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації) – 30-35 балів;
- неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) – 24-29 балів;
- незадовільна відповідь (менше 60% потрібної інформації) – 0 балів.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

| Кількість балів | Оцінка |
|---------------------------|--------------|
| 100-95 | Відмінно |
| 94-85 | Дуже добре |
| 84-75 | Добре |
| 74-65 | Задовільно |
| 64-60 | Достатньо |
| Менше 60 | Незадовільно |
| Не виконані умови допуску | Не допущено |

Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік питань, які виносяться на семестровий контроль, наведено у Додатку 1 до силабусу.

ОРІЄНТОВНИЙ ПЕРЕЛІК ЕКЗАМЕНАЦІЙНИХ ПИТАНЬ ДО КУРСУ

1. Рівняння в часткових похідних параболічного типу в явищах переносу речовини, квантовій механіці, оптиці, електродинаміці. Методи чисельного розв'язку квазілінійних рівнянь такого типу.
2. Апроксимація диференційних рівнянь на різницевої сітці. Методика оцінок похибок апроксимації. Проблеми стійкості обчислень при інтегруванні диференційних рівнянь.
3. Різницева схема Кранка-Ніколса для рівнянь параболічного типу. Метод прогонки пошуку розв'язку системи лінійних рівнянь для трьох-діагональних матриць. Похибки методу.
4. Чисельний розв'язок квазілінійних диференційних рівнянь. Метод змінних напрямків для рівнянь параболічного типу.
5. Хвильовий пакет в оптиці, акустиці та квантовій механіці. Особливості його трансформації в різних середовищах.
6. Методи чисельного розв'язку нестационарного рівняння Шредінгера. Фізична інтерпретація ефектів тунелювання та надбар'єрного відбивання.
7. Параксіальне наближення для опису поширення лазерного променя. Довжина Релея. Сингулярні оптичні промені, топологічний заряд оптичного вихора.
8. Обертальний момент оптичного вихора. Фізичні засади методів його генерації. Чисельна модель розповсюдження вихора в неоднорідних середовищах.
9. Принцип роботи плазмової лінзи, основні припущення при моделюванні її роботи. Методика моделювання particles-in-cells. Вибір шагу моделювання по часу. Оцінка мінімальної густини частинок в системі для задовільної коректності кінцевого результату.
10. Алгоритми розрахунку електричного та магнітного полів на прикладі плазмової лінзи. Методи формування рівнянь для густини електричного заряду на електродах системи та густини поверхневих струмів намагнічування на її магнітних елементах.
11. Динаміка спінів в зовнішніх магнітних полях. Принципи магніторезонансної мікроскопії: продольна та поперечна релаксація.
12. Алгоритми моделювання динаміки спінових систем. Спінова дифузія та спінове відлуння.
13. Методи Монте-Карло для дослідження динаміки багаточастинкових систем. Методи молекулярної динаміки. Модель решіткового газу.
14. Умова детального балансу в Монте-Карло моделях та методика контролю його виконання.
15. Принципи побудови Монте-Карло моделі для розрахунку трансформації форми наночастинок. Відповідність моделі законам термодинаміки.
16. Кінетика розпаду нанодроту на нанокластери. Роль анізотропії густини поверхневої енергії в формуванні періоду цього розпаду.
17. Моделювання синтезу наночастинок в дифузійному режимі. Фактори керування процесом синтезу для формування нанокластерів з наперед заданою формою.
18. Фізичні механізми, які є рушійними силами «шероховатого переходу». Термодинаміка цього переходу. Причини його виникнення тільки на вибраних гранях кристалу.